УДК 66.095

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2021.4.16

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ АНИЛИНА ДИМЕТИЛКАРБОНАТОМ© Г. И. Маннанова^{1*}, К. Ф. Коледина^{1,2}, И. М. Губайдуллин^{1,2}¹Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН

Россия, Республика Башкортостан, 450075 г. Уфа, пр. Октября, 141.

²Уфимский государственный нефтяной технический университет

Россия, Республика Башкортостан, 450062 г. Уфа, ул. Космонавтов, 1.

*Email: gulshat.islamova.2017@mail.ru

В статье приведены результаты математического моделирования кинетики реакции метилирования анилина при помощи диметилкарбоната. Приведен краткий обзор источников, на основе которого были разработаны схема превращений и кинетическая модель процесса. Прямая задача кинетики решалась методом Розенброка 2-го порядка. Обратная задача кинетики решалась при помощи генетического алгоритма. В результате работы было подтверждено, что при температурах 120–145 °С в реакционной смеси преобладает продукт N-метиланилин, а при дальнейшем повышении температуры до 150–200 °С преобладает в реакционной смеси N,N-диметиланилин. Совпадение расчетных и экспериментальных значений концентраций компонентов в реакционной смеси позволяет сделать вывод, что полученная кинетическая модель адекватно описывает реакцию. Рассчитаны энергии активации каждой из элементарных стадий реакции.

Ключевые слова: анилин, диметилкарбонат, кинетика, константа скорости реакции, метилирование, моделирование кинетики, энергия активации.

Введение

Цифровизация системы управления сложных химических процессов многократно увеличивает требования к адекватности математических моделей, происходящих в реакторах химических и физических процессов. Высокий уровень адекватности усложняет математическое описание процессов и аппаратов химической технологии. Развитие же информационных технологий, таких как теория больших данных, технологии параллельных вычислений, визуализация и т.д., позволяет численно решать высоко размерные сложные жесткие обыкновенные дифференциальные уравнения и уравнения в частных производных.

Максимизация выхода продукта в промышленности, минимизация выхода побочных компонент требуют в ходе химической реакции по некоторым продуктам знать, при каких условиях и как они образуются. Зависимости концентраций в любой момент времени при любых соотношениях исходных реагентов и условиях ведения процесса можно установить на основе глубоко детализированных кинетических моделей, которые включают в себя подробную постадийную схему химических превращений, константы скорости и энергии активации.

Объектом исследования является реакция метилирования анилина при помощи диметилкарбоната. Продукты реакции, N-Метил и N,N-диметиланилин, находят широкое практическое приме-

нение в качестве сырья при синтезе красителей, взрывчатых веществ и фармацевтических препаратов. N-Метиланилин используется как антидетонационная добавка к бензинам. Одним из важнейших методов синтеза N-метил и N,N-диметиланилинов является метилирование анилина с помощью диметилкарбоната (ДМК). Синтезы с использованием ДМК нетоксичны для окружающей среды, т.к. не образуют вредных неорганических солей, которые в дальнейшем требуют утилизации [1]. В связи с этим моделирование данной реакции является актуальным.

Теоретический анализ

На сегодняшний день существуют множество научных направлений, которые занимаются разработкой реакции метилирования анилина с применением различных катализаторов и установлением механизма реакции с целью увеличения выхода целевых продуктов и минимизации количества побочных продуктов [2–6]. Установлено влияние температуры на выход целевого продукта N-метиланилина в рассматриваемой реакции [7].

По теории жесткого и мягкого кислотного окисления (ЖМКО), введенной Пирсоном в 1963 г. и далее развитой Мендесом [8], ДМК вступает в реакцию по двум активным центрам. В зависимости от условий реакции и от типа нуклеофила образуются продукты метилирования (B_{Al2}), а также продукты метоксикарбонилирования (B_{Ac2}).

Рис. 1. Механизм метилирования анилина с ДМК по теории ЖМКО.

Две метильные группы представляют собой более мягкие электрофильные участки молекулы, т.к. их насыщенные sp^3 -гибридизованные атомы углерода имеют более слабый положительный заряд. Еще одной особенностью ДМК является то, что он не производит неорганических солей ни при ацилировании, ни при алкилировании [3]. В реакции метилирования с помощью ДМК выходящая группа, т.е. метилкарбонат, после образования быстро разлагается на метанол и метоксид-анион, восстанавливающий основание, которое затем участвует в каталитических реакциях. ДМК – более сильный электрофил, чем метилацетат. Как показано на рис. 1, метоксикарбонилирование является равновесной реакцией, в то время как метилирование необратимо, потому что образующийся CH_3OCOOH разлагается на метанол и CO_2 , следовательно, непрерывный процесс можно легко контролировать, своевременно регулируя температуру. Поскольку и метилирование, и метоксикарбонилирование генерируют CH_3O^- , обе реакции могут проводиться в присутствии небольших количеств оснований [9].

Экспериментальная часть

В работе [10] были описаны экспериментальные результаты проведения реакции метилирования анилина с помощью ДМК в присутствии цеолитного катализатора FeHY . Экспериментальные данные для температуры 145°C приведены в табл. 1.

Таблица 1

Экспериментальные данные реакции метилирования анилина при 145°C [10], мол. доли

Время, мин	Анилин	N-метиланилин	N,N-диметиланилин
0	1	0	0
5	0.98	0.02	0
10	0.96	0.04	0
15	0.945	0.035	0
20	0.74	0.20	0.06
25	0.51	0.39	0.10
30	0.34	0.43	0.23
35	0.20	0.6	0.20
45	0.11	0.6	0.29
60	0.1	0.6	0.3
120	0.11	0.55	0.34
180	0.12	0.6	0.28
240	0.1	0.6	0.3
300	0.1	0.6	0.3
360	0.09	0.62	0.29

Можно заметить, что выход N-метиланилина сильно зависит от условий реакции. Было установлено, что в интервале температур $120\text{--}145^\circ\text{C}$ достигается наибольший выход N-метиланилина, а при дальнейшем повышении температуры происходит увеличение выхода N,N-диметиланилина.

Разработка кинетической модели

В дальнейшем на основе экспериментальных кривых был предложен следующий механизм реакции [11], представленный в табл. 2. Известно, что ДМК с анилином вступают в реакцию по двум активным центрами [11]. В зависимости от температуры ДМК вступают в реакцию как карбоксиметилирующий и метилирующий агенты – реакции 1, 2. Поскольку реакция 2 равновесная, а реакция 1 нет, состав продуктов процесса можно регулировать. В результате этих реакций образуются метилкарбонаты. Продукты этих реакций участвуют в дальнейшем с катализатором FeHY . Метанол вступает в реакцию с катализатором с образованием комплексного соединения – реакция 3. Далее комплекс взаимодействует с анилином, в ходе реакции через промежуточное соединение образуется метиланилин, катализатор выделяется в неизменном виде – реакции 4, 5. При высоких температурах каталитический комплекс вступает в реакцию с метиланилином, и также в ходе реакции через промежуточное соединение образуется диметиланилин – реакции 6, 7.

Таблица 2

Механизм реакции метилирования анилина диметилкарбонатом

Уравнение реакции	Скорость реакции
$\text{ArNH}_2 + (\text{CH}_3\text{O})_2\text{CO} \rightarrow \text{ArNHCH}_3 + \text{CH}_3\text{OH} + \text{CO}_2$	$w(1) = k(1)^\circ\text{C} y(1)^\circ\text{C} y(2);$
$\text{ArNH}_2 + (\text{CH}_3\text{O})_2\text{CO} \rightarrow \text{ArNHCOOCH}_3 + \text{CH}_3\text{OH}$	$w(2) = k(2)^\circ\text{C} y(1)^\circ\text{C} y(2);$
$\text{CH}_3\text{OH} + \text{Fe}^{n+} \rightarrow \{[\text{CH}_3^+][\text{Fe}^{n+}]\}^{n+1}[\text{OH}]^-$	$w(3) = k(3)^\circ\text{C} y(4)^\circ\text{C} y(7);$
$\{[\text{CH}_3^+][\text{Fe}^{n+}]\}^{n+1}[\text{OH}]^- + \text{ArNH}_2 \rightarrow [\text{ArNH}_2\text{CH}_3]^+[\text{Fe}^{n+}][\text{OH}]^-$	$w(4) = k(4)^\circ\text{C} y(1)^\circ\text{C} y(8);$
$[\text{ArNH}_2\text{CH}_3]^+[\text{Fe}^{n+}][\text{OH}]^- \rightarrow \text{ArNHCH}_3 + \text{Fe}^{n+} + \text{H}_2\text{O}$	$w(5) = k(5)^\circ\text{C} y(9);$
$\text{ArNHCH}_3 + \{[\text{CH}_3^+][\text{Fe}^{n+}]\}^{n+1}[\text{OH}]^- \rightarrow [\text{ArNH}(\text{CH}_3)_2]^+[\text{Fe}^{n+}][\text{OH}]^-$	$w(6) = k(6)^\circ\text{C} y(3)^\circ\text{C} y(8);$
$[\text{ArNH}(\text{CH}_3)_2]^+[\text{Fe}^{n+}][\text{OH}]^- \rightarrow \text{ArN}(\text{CH}_3)_2 + \text{Fe}^{n+} + \text{H}_2\text{O}$	$w(7) = k(7)^\circ\text{C} y(11);$
$\text{ArNHCOOCH}_3 + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{ArNH}_2 + (\text{CH}_3\text{O})_2\text{CO}$	$w(8) = k(8)^\circ\text{C} y(4)^\circ\text{C} y(6).$

Рис. 2. Кинетические кривые при 145 °С.

Была составлена математическая модель реакции на основе предложенного механизма, с использованием закона действующих масс [12]:

$$\left\{ \begin{array}{l} dy(1) = -w(1) - w(2) - w(4) + w(8) \\ dy(2) = -w(1) - w(2) + w(8) \\ dy(3) = w(1) + w(5) - w(6) \\ dy(4) = w(1) + w(2) - w(3) - w(8) \\ dy(5) = w(1) \\ dy(6) = w(2) - w(8) \\ dy(7) = -w(3) + w(5) + w(7) \\ dy(8) = w(3) - w(4) - w(6) \\ dy(9) = w(4) - w(5) \\ dy(10) = w(5) + w(7) \\ dy(11) = w(6) - w(7) \\ dy(12) = w(7) \end{array} \right. \quad (1)$$

начальные данные: $y_i(0)=y_i^0$. Здесь $y(1)$ – ArNH_2 ; $y(2)$ – $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{CO}$; $y(3)$ – ArNHCH_3 ; $y(4)$ – CH_3OH ; $y(5)$ – CO_2 ; $y(6)$ – ArNHCOOCH_3 ; $y(7)$ – Fe^{n+} ; $y(8)$ – $[\text{CH}_3^+][\text{Fe}^{n+}]^{n+1}[\text{OH}]$; $y(9)$ – $[\text{ArNH}_2\text{CH}_3]^+[\text{Fe}^{n+}][\text{OH}]$; $y(10)$ – H_2O ; $y(11)$ – $[\text{ArNH}(\text{CH}_3)_2]^+[\text{Fe}^{n+}][\text{OH}]$; $y(12)$ – $\text{ArN}(\text{CH}_3)_2$.

Расчет параметров кинетической модели

Моделирование кинетики химической реакции сводилось к решению задачи Коши, т.е. к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений для нахождения констант скоростей реакции [13]. В прямой задаче кинетики выполнялся расчет концентраций веществ в реакционной смеси в зависимости от времени. В связи с разными порядками констант скоростей реакций, жесткостью системы дифференциальных уравнений была применена формула Розенброка 2-го порядка [14]. Обратная задача кинетики, т.е. определение констант скоростей, при которых расчетные кинетические кривые максимально совпадают с фактическими, решалась с помощью генетического алгоритма. Оптимизационный критерий имеет вид:

$$\sum_{i=1}^{12} \frac{|y(i)^{\text{calc}} - y(i)^{\text{exp}}|}{y(i)^{\text{exp}}} \rightarrow \min, \quad (2)$$

где $y(i)^{\text{calc}}$ – расчетные значения концентраций; $y(i)^{\text{exp}}$ – экспериментальные значения концентраций.

На рис. 2 показаны результаты моделирования при 145 °С.

Как видно из графика, предложенная модель хорошо описывает получаемые продукты реакции – N-метиланилин и N,N-диметиланилин. Несколько большая погрешность имеется при описании концентрации анилина в реакционной смеси. Значение функционала невязки 7.1%.

Следующим этапом работы является моделирование кинетики реакции при различных температурах для расчета значений энергии активации каждой стадии химического процесса. В данном случае было проведено моделирование кинетики реакции алкилирования анилина при 150 и при 200 °С.

При 150 °С в ходе эксперимента было известно, что получаются продукты в соотношении 1:1. В ходе моделирования образуются продукты N-метиланилин и N,N-диметиланилин примерно в равных количествах.

При высоких температурах 200 °С в основном образуется продукт N,N-диметиланилин. N-метиланилин образуется в начале реакции, но при дальнейшем увеличении времени реакции концентрация N-метиланилина проходит через максимум, а затем он полностью расходуется с образованием N,N-диметиланилина.

В результате расчетов с применением уравнения Аррениуса были получены значения энергии активации, приведенные в табл. 3.

Таблица 3

Энергии активации реакций	
Энергия активации, ккал/моль	Предэкспоненциальный множитель
6.23	$8.11 \cdot 10^6 \text{ л/моль} \cdot \text{мин}$
7.163	$7.26 \cdot 10^6 \text{ л/моль} \cdot \text{мин}$
5.02	$5.24 \cdot 10^6 \text{ л/моль} \cdot \text{мин}$
28.89	$5.10 \cdot 10^6 \text{ л/моль} \cdot \text{мин}$
30.82	$7.42 \cdot 10^6 \text{ мин}^{-1}$
4.07	$8.01 \cdot 10^6 \text{ л/моль} \cdot \text{мин}$
6.09	$1.79 \cdot 10^{10} \text{ мин}^{-1}$
27.75	$1.11 \cdot 10^6 \text{ л/моль} \cdot \text{мин}$

На основе результатов моделирования можно сделать вывод, что результаты расчетов по предложенному механизму реакции согласуются с результатами химического эксперимента. Подтверждаются ранее установленные выводы, что при низких (120–145 °С) температурах в реакционной смеси преобладает продукт N-метиланилин, а при даль-

нейшем повышении температуры до 150–200 °C преобладает в реакционной смеси N,N-диметиланилин. Следует отметить, что взаимодействие анилина с каталитическим комплексом, образующимся по реакции 3, с образованием метиланилина, является наиболее энергетически затрудненной и, следовательно, лимитирующей стадией процесса. Реакции образования диметиланилина (6, 7) протекают с большей скоростью при высоких температурах.

Разработанная кинетическая модель в виде программного комплекса является частью информационно-вычислительных аналитических систем (ИВАС) моделирования, оптимизации и автоматизации процессов и аппаратов химической технологии [15–17].

В дальнейшем разработанная кинетическая модель будет использоваться для многокритериальной оптимизации каталитической реакции алкилирования анилина диметилкарбонатом. Например, численным анализом, используя технологии параллельных вычислений [18–19], можно будет установить такие режимы проведения процесса, доставляющие максимум выхода N-метиланилина или N,N-диметиланилина. Определив интервалы оптимальных условий режимных показателей, можно будет решить задачу оптимального управления.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема №АААА-А19-119022290011-6).

ЛИТЕРАТУРА

- Pyo Sang-Hyun, Park Ji Hoon, Chang Tae-Sun, Hatti-Kaul Rajni. Dimethyl carbonate as a green chemical // *Green and Sustainable Chemistry*. 2017. No. 5. Pp. 61–66.
- Stytsenko V. D., Huu Tao Do, Vinokurov V. A. Catalytic Alkylation of Aniline with Methanol // *Kinetics and Catalysis*. 2005. Vol. 46. No. 3. Pp. 376–379.
- Mantrov S. N., Gordeev D. A., Dashkin R. R., Nefedov P. A., Seferyan M. A. Interaction of dimethyl carbonate with anilines in the presence of potassium methylate: kinetics and the role of the base // *International Journal of Chemical Kinetics*. 2019. Vol. 51. No. 10. Pp. 777–785.
- Jing Meng, Hui-Min Xia, Ai-Qing Xu, Yi-Feng Wang, Zhijuan Wang, Feng-Lian Zhang. Selective N-monomethylation of Primary Anilines with the Controllable Installation of N-CH 2 D, N-CHD 2 and N-CD 3 Units // *Organic and Biomolecular Chemistry*. 2020. No. 6. Pp. 1–5.
- Deliana Dahnum, Bora Seo, Seok-Hyeon Cheong, Ung Lee, Jeong-Myeong Ha, Hyunjo Lee. Formation of defect site on ZIF-7 and its effect on the methoxycarbonylation of aniline with dimethyl carbonate // *Journal of Catalysis*. 2019. No. 5. P. 1–10.
- Hong-Zi Tan, Zhi-Qiao Wang, Zhong-Ning Xu, Jing Sun, Yu-Ping Xu, Qing-Song Chen, Yumin Chen, Guo-Cong Guo. Review on the synthesis of dimethyl carbonate // *Catalysis Today*. 2018. Vol. 316. No. 10. Pp. 2–12.
- Tundo Pietro, Musolino Manuele, Aricò Fabio. Replacement of Toxic Feedstocks in Chemical Synthesis // *Green Chemistry and Chemical Engineering*. 2019. P. 257.
- Gazquez J. L., Mendez F. J. The hard and soft acids and bases principle: an atoms in molecules viewpoint // *J. Phys. Chem.* 1994. Vol. 98. No. 17. Pp. 4591–4593.
- Tundo P., Musolino M., Aricò F. The reactions of dimethyl carbonate and its derivatives. The Royal Society of Chemistry. 2017. Vol. 18. No. 7. Pp. 1821–1878.
- Khusnutdinov R. I., Shchadnina N. A., Mayakova Yu. Yu., Abdurakhmanov A. N., Khazipova A. N., Kutepov B. I. Methylation of Aniline and Its Derivatives with Dimethyl Carbonate under the Action of Zeolite FeHY-mmm // *Russian Journal of Organic Chemistry*. 2019. Vol. 55. No. 8. Pp. 1085–1087.
- Arico F., Tundo P. Dimethyl carbonate: a modern green reagent and solvent // *Russian Chemical Reviews*. 2010. Vol. 79. No. 6. Pp. 479–489.
- Коледина К. Ф., Коледина С. Н., Губайдуллин И. М., Сафин Р. Р., Ахметов И. В. Информационная система построения кинетической модели каталитической реакции, планирование экономически оптимального химического эксперимента // *Системы управления и информационные технологии*. 2015. №3(61). С. 79–84.
- Губайдуллин И. М., Коледина К. Ф., Сафин Р. Р. Автоматизированная система структурной и параметрической идентификации кинетических моделей химических реакций с участием металлоорганических соединений на основе базы данных кинетических исследований // *Системы управления и информационные технологии*. 2014. №4(58). С. 10–16.
- Лекомцев А. В., Пименов В. Г. Метод типа Розенброка для численного решения функционально-дифференциально-алгебраических уравнений // *Известия Уральского гос. ун-та*. 2010. №74. С. 83–113.
- Kabanikhin S. I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*. 2008. Vol. 16. No. 4. Pp. 317–357.
- Новичкова А. В., Бобреева Ю. О., Губайдуллин И. М., Коледина К. Ф. Информационные системы моделирования реакционной способности алкенов в реакции гидроалюминирования олефинов триизобутилалюминием // *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. 2014. Т. 10. №3. С. 55–61.
- Коледина К. Ф., Губайдуллин И. М. Программный комплекс для решения обратных задач химической кинетики и его реализация в виде виртуального испытательного стенда // *Наука и образование: научное изд-е МГТУ им. Н. Э. Баумана*. 2013. №7. С. 385–398.
- Ахметов И. В., Губайдуллин И. М. Разработка кинетических моделей с использованием параллельных вычислений на многоядерных системах // *Вестник Омского ун-та*. 2012. №2(64). С. 172–174.
- Губайдуллин И. М., Линд Ю. Б., Коледина К. Ф. Методология распараллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. №2. С. 28–36.

Поступила в редакцию 08.07.2021 г.

MATHEMATICAL MODELING OF THE KINETICS OF THE CATALYTIC REACTION OF ANILINE ALKYLATION WITH DIMETHYL CARBONATE

© G. I. Mannanova^{1*}, K. F. Koledina^{1,2}, I. M. Gubaydullin^{1,2}

¹*Institute of Petrochemistry and Catalysis, Ufa Federal Research Center of RAS
141 Oktyabrya Avenue, 450075 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

²*Ufa State Petroleum Technological University
1 Kosmonavtov Street, 450062 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

*Email: gulshat.islamova.2017@mail.ru

The authors of the article present the results of mathematical modeling of the kinetics of the aniline methylation reaction using dimethyl carbonate. A brief overview of the sources on the basis of which the transformation scheme and the kinetic model of the process were developed is given. The direct problem of kinetics, which consists in calculating the rate constants of chemical reactions according to the law of acting masses, was solved by the Rosenbrock method of the 2nd order. The inverse problem of kinetics, which consists in finding the minimum sum of the residuals between the calculated and experimental concentrations, was solved using a genetic algorithm. As a result of the work, it was confirmed that at temperatures of 120–145 °C, the product N-methylaniline prevails in the reaction mixture, and with a further increase in temperature to 150–200 °C, N,N-dimethylaniline prevails in the reaction mixture. The coincidence of the calculated and experimental values of the concentrations of the components in the reaction mixture allows the authors to conclude that the obtained kinetic model adequately describes the reaction. The activation energies of each of the elementary reaction stages are calculated using the Arrhenius equation. The developed kinetic model in the form of a software package is part of information and computational analytical systems for modeling, optimization and automation of processes and devices of chemical technology. The kinetic model can be used for multi-criteria optimization of the aniline alkylation reaction with dimethyl carbonate.

Keywords: activation energy, aniline, dimethyl carbonate, kinetic constant, kinetics, kinetics modeling, methylation.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. Pyo Sang-Hyun, Park Ji Hoon, Chang Tae-Sun, Hatti-Kaul Rajni. Dimethyl carbonate as a green chemical. *Green and Sustainable Chemistry*. 2017. No. 5. Pp. 61–66.
2. Stytsenko V. D. *Kinetics and Catalysis*. 2005. Vol. 46. No. 3. Pp. 376–379.
3. Mantrov S. N., Gordeev D. A., Dashkin R. R., Nefedov P. A., Seferyan M. A. *International Journal of Chemical Kinetics*. 2019. Vol. 51. No. 10. Pp. 777–785.
4. Jing Meng, Hui-Min Xia, Ai-Qing Xu, Yi-Feng Wang, Zhijuan Wang, Feng-Lian Zhang. Selective N-monomethylation of Primary Anilines with the Controllable Installation of N-CH 2 D, N-CHD 2 and N-CD 3 Units. *Organic and Biomolecular Chemistry*. 2020. No. 6. Pp. 1–5.
5. Deliana Dahnum, Bora Seo, Seok-Hyeon Cheong, Ung Lee, Jeong-Myeong Ha, Hyunjoon Lee. Formation of defect site on ZIF-7 and its effect on the methoxycarbonylation of aniline with dimethyl carbonate. *Journal of Catalysis*. 2019. No. 5. Pp. 1–10.
6. Hong-Zi Tan, Zhi-Qiao Wang, Zhong-Ning Xu, Jing Sun, Yu-Ping Xu, Qing-Song Chen, Yumin Chen, Guo-Cong Guo. Review on the synthesis of dimethyl carbonate. *Catalysis Today*. 2018. Vol. 316. No. 10. Pp. 2–12.
7. Tundo Pietro, Musolino Manuele, Aricò Fabio. Replacement of Toxic Feedstocks in Chemical Synthesis. *Green Chemistry and Chemical Engineering*. 2019. Pp. 257.
8. Gazquez J. L., Mendez F. J. *J. Phys. Chem.* 1994. Vol. 98. No. 17. Pp. 4591–4593.
9. Tundo P., Musolino M., Aricò F. The reactions of dimethyl carbonate and its derivatives. *The Royal Society of Chemistry*. 2017. Vol. 18. No. 7. Pp. 1821–1878.
10. Khusnutdinov R. I., Shchadneva N. A., Mayakova Yu. Yu., Abdrakhmanov A. N., Khazipova A. N., Kutepov B. I. *Russian Journal of Organic Chemistry*. 2019. Vol. 55. No. 8. Pp. 1085–1087.
11. Arico F., Tundo P. *Russian Chemical Reviews*. 2010. Vol. 79. No. 6. Pp. 479–489.

12. Koledina K. F., Koledin S. N., Gubaidullin I. M., Safin R. R., Akhmetov I. V. Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii. 2015. No. 3(61). Pp. 79–84.
13. Gubaidullin I. M., Koledina K. F., Safin R. R. Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii. 2014. No. 4(58). Pp. 10–16.
14. Lekomtsev A. V., Pimenov V. G. Izvestiya Ural'skogo gos. un-ta. 2010. No. 74. Pp. 83–113.
15. Kabanikhin S. I. Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. Vol. 16. No. 4. Pp. 317–357.
16. Novichkova A. V., Bobreneva Yu. O., Gubaidullin I. M., Koledina K. F. Elektrotekhnicheskie i informatsionnye komplekсы i sistemy. 2014. Vol. 10. No. 3. Pp. 55–61.
17. Koledina K. F., Gubaidullin I. M. Nauka i obrazovanie: nauchnoe izd-e MGTU im. N. E. Bauman. 2013. No. 7. Pp. 385–398.
18. Akhmetov I. V., Gubaidullin I. M. Vestnik Omskogo un-ta. 2012. No. 2(64). Pp. 172–174.
19. Gubaidullin I. M., Lind Yu. B., Koledina K. F. Vychislitel'nye metody i programmirovaniye. 2012. Vol. 13. No. 2. Pp. 28–36.

Received 08.07.2021.